



TITLE:

Systematic Structure Synthesis of Distillation-Based Separation Processes(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Takase, Hiroshi

CITATION:

Takase, Hiroshi. Systematic Structure Synthesis of Distillation-Based Separation Processes. 京都大学, 2018, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2018-03-26

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k21130>

RIGHT:

許諾条件により本文は2019-03-01に公開

京都大学	博士（工学）	氏名	高瀬 洋志
論文題目	Systematic Structure Synthesis of Distillation-Based Separation Processes (蒸留を基軸とした分離プロセスの系統的構造合成手法)		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>本論文では、蒸留を基軸とした分離プロセスの更なる強化に資するべく、プロセス構造を事前に限定しない大規模な最適化を通して対象プロセスを合成する手法の構築に取り組んでおり、7章からなっている。</p> <p>第1章では、まず、蒸留操作の省エネルギー化のためのいくつかの基礎技術を整理している。そして、そのような省エネルギー手段の適用を試みる場合にはプロセスの設計問題が複雑になるため、経済性のある省エネルギー蒸留プロセスを設計するには、設計問題を系統的に解く方法論が必要であることを指摘している。つづいて、既往のプロセス合成・設計手法を整理している。その中で、プロセス構造に関する限定を一切伴わない大規模な最適化を現実的な計算負荷で実現する方法論として、状態空間の離散化により最適化問題から非線形性を排除するアプローチに着目している。その上で、この方法論を応用した既往研究では、段数や流路の数が非常に多い複雑なプロセス構造しか得られない傾向が強いことを指摘している。この点を踏まえ、本研究では、最適化問題から非線形性を排除することでプロセス構造を事前に仮定しない最適化が行えるようにしながらも、より単純な構造の最適化結果を得る方法を検討対象としている。そして、定式化やプロセス合成手順を工夫することにより、実用に耐えうる単純な構造を有した高性能プロセスやそのようなプロセスを実現するための有用な情報を導出する手法の開発を目的としたことを説明している。</p> <p>第2章では、プロセス内での熱交換を考慮した2成分蒸留プロセスを対象として、プロセス合成手法を構築している。状態空間を離散化してその1つ1つをモジュールとして蒸留塔の気液接触段に対応させ、プロセス合成問題をそれらの組合せ問題として捉えることで、線形な関係式のみで定式化でき、非線形性を含まないために、任意の段間での蒸気・液・熱の授受を考慮した大規模な最適化を現実的な計算時間で行えることを示している。また、0-1変数を用いてプロセスに含まれる気液接触段の総数を評価関数に組み込むとともに、プロセスの運転コストのみならず、熱交換器やコンプレッサ、ポンプといった関連機器の設備コストも考慮することで、単純な構造のプロセスが得られるように工夫している。続いて、ケーススタディとして、提案手法をベンゼン・トルエン分離に適用した結果を示している。このケーススタディでは、段階式コンデンサと呼ばれる、今まで提案されていない、新しい部分構造が導出されている。そして、熱力学的な視点からこの新しい部分構造の特徴を分析し、その有用性を示すとともに、どのような場合により大きな効用が得られるのかを考察している。</p> <p>第3章では、第2章で構築した枠組みを3成分蒸留に拡張している。3成分系では、次元が高くなった分、離散化して生成されるモジュールの数が非常に多くなり、それに伴い最適化問題の規模が非常に大きくなる。よって、第2章で行ったように0-1変数を導入して定式化を行うと、現実的な計算時間で求解できない。この問題を解決するために、連続近似による線形計画問題を繰り返し解くことで、0-1変数を導入せずに設備コストを考慮した定式化と求解を行う手順が新たに構築されている。このアルゴリズムにより得られるプロセス構造は、0-1変数を用いた方法で得られるものと比べると、複雑</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	高 瀬 洋 志
<p>なものになってしまう傾向がある。しかし、分離モジュール間の主要な接続関係や液組成プロファイルに着目して最適化結果を解釈することにより、実用可能な単純なプロセス構造を導出できることがケーススタディにおいて示されている。</p> <p>第4章では、適用対象を反応蒸留プロセスに拡張している。3成分系において、蒸留と同時に液相反応を行う場合を想定し、各気液接触段において速度論的に進行する反応を表現できるようにモデルが改良されている。そして、各気液接触段における反応を考慮した場合でも、反応を考慮しない場合と類似な定式化が可能であることが示されている。ケーススタディでは、提案手法を2-ペンテンのメタセシス反応に適用しており、これまでにない新しいプロセス構造を示唆する結果が得られている。この結果に対して、第3章で行ったのと同様の方法で解釈を行うことにより、実現可能なプロセス構造を導出している。さらに、プロセスシミュレータを用いた厳密なシミュレーションにより、提案手法で導出された新しいプロセス構造と一般的なプロセス構造を種々の条件下で比較し、新しいプロセス構造の優位性を示している。</p> <p>第5章では、液相組成を離散化せず連続変数として扱っても非線形な関係式を含まない形でプロセス合成問題を定式化する方法が提案されている。まず、最適化結果が複雑な構造のプロセスとなる原因の一つが、状態空間の離散化であることが説明されている。続いて、提案されている定式化方法を用いると、より単純な構造のプロセスが得られやすいことを示している。この方法では、気液平衡関係を階段状関数で近似することにより、液組成を離散点ではなく連続的な領域として扱いながらも、プロセス合成問題は依然として線形な式のみで定式化されている。ケーススタディでは、ベンゼン・トルエン分離を対象に構築した代替方法を適用し、最適化結果として非常に単純な構造のプロセスが得られることを例証している。さらに、得られた結果をプロセスシミュレータを用いた厳密なシミュレーションと比較することで、提案手法を用いた最適化の精度が十分に高いことを確認している。</p> <p>第6章では、第5章で開発した新しい定式化方法を用いて、蒸留/膜ハイブリッド分離プロセスの合成手法が構築されている。膜分離操作のモデルが新たに構築されており、非線形方程式や微分方程式が関連する計算を最適化の前に行うことで、蒸留操作と膜分離操作を同時に考慮した場合でも、プロセス合成問題を線形な式のみで定式化できることが示されている。ケーススタディにおいては、構築した手法がプロパン・プロピレン分離に適用されている。最適化の結果、エネルギー消費量が少ない、これまでにない新しいプロセス構造が導出されている。そして、プロセスシミュレータを用いた厳密なシミュレーションに基づいて、この新しいプロセス構造の特徴が考察されている。</p> <p>第7章は結論であり、本研究の成果について総括するとともに、今後の研究課題を整理している。</p>			

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、事前にプロセス構造を限定せずに蒸留を含む分離プロセスを系統的に合成する手法の開発に関する成果をまとめたものである。得られた主要な成果を以下に示す。

1) 状態空間離散化法を用いたプロセス合成手法の開発

状態空間を離散化して蒸留塔の段に対応させ、それらの組合せ問題としてプロセス合成問題を定式化する手法を提案し、その手法を用いることで、装置コストや運転コストからなる評価指標を最適化するプロセス合成問題を、混合整数線形計画問題として定式化できることを示した。そして、計算負荷が過大になる 0-1 変数を多く含む問題に対して、連続近似による線形計画問題を繰り返し解く近似求解アルゴリズムを開発した。また、気液平衡関係を階段状関数で近似することにより、液組成を離散点でなく連続な領域としてモデル化しても線形計画問題として定式化できることを示した。そして、開発した手法を、下記の 2)、3)、4) に示す対象に適用し、その有効性を検証した。

2) 状態空間離散化法を用いた最適蒸留プロセス構造の導出

2 成分混合物の分離問題を対象に、異なる圧力の蒸留段モジュールを準備することで、最適化結果として内部熱交換型蒸留プロセスと類似の構造が得られることを示した。また、3 成分分離問題に対して、ペトリュク型蒸留プロセスに類似の構造が得られることを示した。

3) 状態空間離散化法を用いた蒸留と反応の複合プロセス構造の導出

各蒸留段に反応を組み込んでも、反応が無い場合と類似な定式化が可能であることを示した。そして、得られた成果を 2-ペンテンのメタセシス反応を扱うケースに適用し、これまでにない新しいプロセス構造を示唆する最適化結果を得た。

4) 状態空間離散化法を用いた蒸留と膜の複合プロセス構造の導出

膜分離操作のモデルを新たに構築し、開発した手法を蒸留/膜ハイブリッド分離プロセスの合成問題に適用できるように拡張した。そして、プロパンとプロピレンの分離問題に適用し、エネルギー消費が少ない、これまでにない新しいプロセス構造を示唆する最適化結果を得た。

このように本論文は、プロセスの構造を仮定すること無く、最適なプロセス構造を導出する手法についてまとめたものであり、新規で有用な知見を多く含んでおり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 30 年 2 月 19 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。